競合的三角格子磁性体の量子力学的研究(磁性体における新しいタイプの相転移現象,研究会報告)

鈴木, 増雄

競合的三角格子磁性体の量子力学的研究

東京大学理学部　鈴木増雄

§1. はじめに

図1のような三角格子上での反強磁性量子ハイゼンベルグ模型は、量子統計物理学の中でも特別興味深い研究対象である。[1)~3)] 一つには、フラストレーションがあるため、通常の相転移とは本質的に違った相転移が期待されるからである。[1)~3)] ここでは、温度場の量子論（Thermo Field Dynamics）の方法[3),4)]を用いて、この問題に対する有限温度の変分理論を作り、その物理的意味について考察する。[3)]

§2. 温度場の量子論

Takahashi－Umezawa の方法[4)]を相互作用のある系に拡張した次の一般論[5)~7)]が我々の出発点である。すなわち、一般に、任意の物理量Qの熱平衡状態における平均$\langle Q\rangle$は、有限温度の場（温度真空）$|0(\beta)\rangle$を用いて、

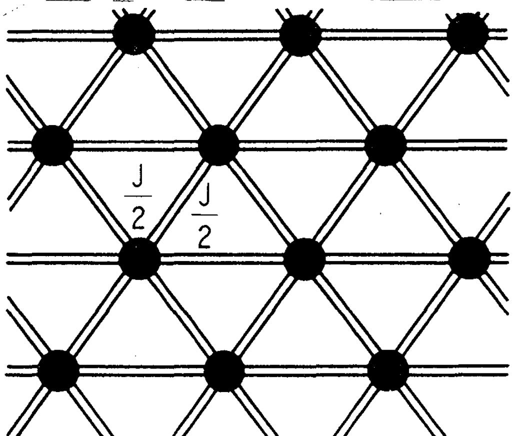
$$\langle Q\rangle=\langle 0(\beta)|Q|0(\beta)\rangle\ ;\quad |0(\beta)\rangle=Z(\beta)^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}\beta\mathcal{H}}|I\rangle \quad (2.1)$$

と表わせる。[4)] 但し、$|I\rangle$はハミルトニアン$\mathcal{H}$の固有状態$|n\rangle$（すなわち$\mathcal{H}|n\rangle=E_n|n\rangle$）とtilde spaceの$|\tilde{n}\rangle$を用いて、$|I\rangle=\sum_n|n\rangle|\tilde{n}\rangle$と書ける。最近の研究によると、[5)~7)] 任意の完備直交系$\{|\alpha\rangle\}$を用いて、

$$|I\rangle=\sum_\alpha|\alpha\rangle|\tilde{\alpha}\rangle=\sum_\alpha|\alpha,\tilde{\alpha}\rangle \quad (2.2)$$

と表わせる。したがって、$|0(\beta)\rangle$は

$$|0(\beta)\rangle=Z(\beta)^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}\beta\mathcal{H}}\sum_\alpha|\alpha,\tilde{\alpha}\rangle \quad (2.3)$$



第１図

と表わされる。[5)~7)] これは、任意の相互作用のある系の温度場のダイナミックスの出発点になる式である。これは、いわば、$T=\infty$の乱れた状態$|0(0)\rangle$に相互作用$\mathcal{H}$の効果を$\exp(-\frac{1}{2}\beta\mathcal{H})$によってとり入れて、有限温度の平衡状態を作るという直観的意味を持っている。したがって、$\exp(-\frac{1}{2}\beta\mathcal{H})$を局所的相互作用に対するボルツマン因子$\exp(-\frac{1}{2}\beta\mathcal{H}(ij))$に分解して$|0(\beta)\rangle$を具体的に計算することが可能となる。その方法としては、一般化されたトロッター公式[8)]

$$e^{A_1+A_2+\cdots+A_p}=\lim_{n\to\infty}\left(e^{\frac{1}{n}A_1}e^{\frac{1}{n}A_2}\cdots e^{\frac{1}{n}A_p}\right)^n \quad (2.4)$$

を用いるとよい。[5)~7)]

§3. 有限温度の変分法（温度場変分法）

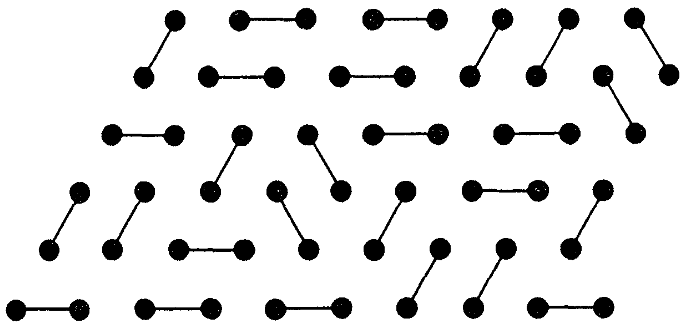
温度場$|0(\beta)\rangle$の変分状態として、

$$|\Psi(\theta)\rangle = \prod_{\langle ij\cdots k\rangle} U_{ij\cdots k}(\theta)\,|0(0)\rangle \qquad (3.1)$$

をとる。但し、$U_{ij\cdots k}(\theta)$は、適当な局所的演算子である。これは、（2.4）の公式を用いて得られる経路積分表示[5)〜7)]から予想することもできる。[5)〜7)]変分パラメータθは$|\Psi(\theta)\rangle$から求められる自由エネルギー$F(\theta)=E(\theta)-TS(\theta)$最小の条件から決める。

§4. 2次元3角格子反強磁性ハイゼンベルグモデルの有限温度の変分理論

P. W. Anderson[7)]は上記の模型の$T=0$における変分状態として、第2図のような1重項の対の積からなるコヒーレントな変分関数が重要であろうと指摘した。ここでは、Andersonの$T=0$の変分関数を$T>0$に拡張する。§3で述べた有限温度の変分原理に従って、



第2図

$$|\Psi\rangle_T = \mathcal{N}\left[\sum\prod\left(uQ_{ij}+vP_{ij}\right)\right]|I\rangle \qquad (4.1)$$

をとる。但しP_{ij}, Q_{ij}はそれぞれ、1重項、3重項への射影演算子である。$\sum\prod$は、対は、第2図のように、すべて重ならないように、あらゆる仕方での分割を表わす。u, vは、温度Tに依存した変分パラメータである。ハミルトニアンを$\mathcal{H}=-J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\cdot\sigma_j$ $(J<0)$として、これに対するエネルギーEは、"対近似"で、

$$E=\langle\Psi|\mathcal{H}|\Psi\rangle_T = -\frac{1}{2}NJ\langle\Psi|1-4P_{ij}|\Psi\rangle_T \simeq -\frac{3}{2}NJ(u^2-v^2) \qquad (4.2)$$

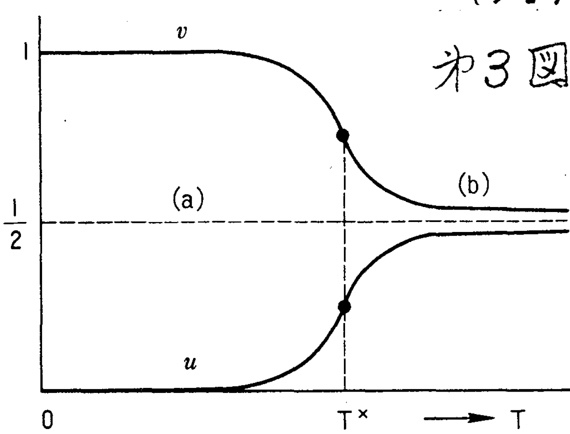
と求められる。[5)〜7)]エントロピーSは、

$$S=-\frac{1}{2}Nk_B\left(3u^2\log u^2+v^2\log v^2\right) \qquad (4.3)$$

と与えられる。また規格化条件より、$3u^2+v^2=1$が成立する。自由エネルギー$F=E-TS$を最小にする条件より、u, vが

$$u^2=\frac{1}{e^{-4K}+1}, \qquad v^2=e^{-4K}/(e^{-4K}+1) \qquad (4.4)$$

と求められ、第3図のように温度と共に変化することがわかる。[5)〜7)]これより、クロスオーバー温度$T^\times$があって、$T<T^\times$では、1重項が主となる、近似的に"コヒーレントな"状態、$T>T^\times$では、1重項と3重項が大体等しく混じった乱れた状態になるものと解釈される。[5)〜7)]但し、$T^\times$は、$T^\times\simeq 3.6(|J|/k_B)$と求められる。[5)〜7)]もっと正確に、非対角項



第3図

を入れて、充分にコヒーレントな効果をとり入れると、シャープに相転移が起こる可能性もある。これは目下研究中である。

実際、最近の厳密な計算によると,[9] 第2図の分配の仕方Mは、大体

$$M \sim 6^{N/4} \qquad (4.5)$$

の程度ある。これは、Andersonの見積り$M_A \sim 2^{3N/8}$よりもはるかに大きく、この系がいかに縮退しているかがよくわかる。しかも、これらM個の状態は、必ずしも互いに独立ではない。このため、(4.1)の変分関数の範囲でも、波動関数の規格化及び、エネルギーE, エントロピーSを閉じた形で求めることは、非常に困難な問題である。逆に言えば、(4.1)の変分関数でも、このAnderson problemの難かしい本質的な部分を含んでいると期待される。

§5. 結び

このように、上記の問題は、まだ、研究の途上にあり、むしろ、今後の成果を期待すべきであろう。

参考文献

1) P. W. Anderson, Mat. Res. Bull. 8 (1973), 153.
2) K. Hirakawa et al., J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985), 3526.
3) M. Suzuki, J. Stat. Phys. Vol. 42, Nos 5/6, 1986, and references cited therein.
4) H. Umezawa, H. Matsumoto and M. Tachiki, Thermo Field Dynamics and Condensed State (North-Holland 1982).
5) M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985),4483, and references cited therein.
6) M. Suzuki, Progress in Quantum Field Theory, ed. H. Ezawa and S. Kamefuchi (North-Holland Pub.).
7) M. Suzuki, Proceedings of International Symposium "Quantum Field Theory" held at Positano, June 5 - 7, 1985.
8) M. Suzuki, Commun. Math. Phys. 51 (1976), 183; J. Math. Phys. 26 (1985), 601: Phys. Lett. 113A (1985), 299.
9) M. Inoue, T. Chikyu, X. Hu and M. Suzuki, in preparation.

付録(文献5のアブストラクト)

Journal of the Physical Society of Japan
Vol. 54, No. 12, December, 1985, pp. 4483–4485

LETTERS

Thermo Field Dynamics in Equilibrium and Non-Equilibrium Interacting Quantum Systems

Masuo SUZUKI

Department of Physics, Faculty of Science, University of Tokyo, Hongo, Bunkyo-ku 113

(Received October 15, 1985)

A general representation of the thermal quantum state is given for any interacting quantum system such as fermi, bose and quantum spin systems. A fundamental equation of quantum non-equilibrium systems is obtained on the basis of the time-dependent thermal quantum state $|\Psi(t)\rangle$.